

Uppgifterna diskuteras i grupp på ons 22.1 (efter att vi gått igenom svaren till RÖ 1). Fundera därför om ni har frågor om uppgifterna tills dess. Därefter har ni tid tills to 30.1 kl. 22:00 att lämna in svaren. Räkneövning 2 hålls ti 4.2.

1. Hur stor är den attraktiva kraften mellan en Ca^{2+} och en O^{2-} jon, ifall avståndet mellan dem är 1,25 nm?
2. Potentialenergin mellan två närbelägna joner kan ges som

$$E_N(r) = -\frac{A}{r} + \frac{B}{r^n}, \quad (1)$$

där r är avståndet mellan jonerna, medan n , A och B är specifika konstanter för materialet i fråga. Ge bindingsenergin E_0 med hjälp av konstanterna n , A och B .

3. För ett $\text{Na}^+ - \text{Cl}^-$ jonpar kan den attraktiva (E_A) och repulsiva (E_R) delen av potentialenergin ges som en funktion av avståndet mellan jonerna (r):

$$E_A(r) = -\frac{1.436}{r} \quad (2)$$

och

$$E_R(r) = \frac{7.32 \times 10^{-6}}{r^8}. \quad (3)$$

Energierna är givna i eV per jonpar och avståndet mellan jonerna är given i nm. Potentialenergin är $E_N = E_A + E_R$.

- (a) Teckna E_N , E_A och E_R som en funktion av r i samma bild upp till 1,0 nm.
 - (b) På basis av bilden, bestäm (i) jämviktsavståndet, r_0 , och (ii) bindingsenergin, E_0 , mellan jonerna.
 - (c) Jämför resultaten i (b) med motsvarande numeriska resultat baserade på uppgift 2.
4. Anta ett endimensionellt gitter med $2N \gg 1$ joner, vilka har en alternerande laddning $\pm q$ och en repulsiv potential A/r^n mellan närbelägna joner. Visa att kohesionsenergin är

$$U = -\frac{(2 \ln 2) N q^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(1 - \frac{1}{n}\right), \quad (4)$$

där r_0 är jämviktsavståndet mellan jonerna. Tips: $\ln(1+x) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} (x^n/n)$.

5. Ge en förklaring till varför material som uppvisar kovalent bindning ofta har en lägre densitet än material vilka uppvisar jonisk eller metallisk bindning.
6. Man kan bestämma ett ämnes kohesionsenergi t.ex. utgående ifrån CRC:s tabell "standard thermodynamic properties" (<http://www.hbcpnbase.com>). Den ger formationsentalpier så att det termodynamiska grundtillståndet för varje ämne vid rumstemperatur har värdet 0. Negativa värden anger bundna tillstånd. För föreningar ges värden som referens till grundtillståndet av grundämnena. Bestäm med hjälp av CRC:s tabeller kohesionsenergin för (a) Ga, (b) As, (c) Si, (d) GaAs, (e) SiO_2 , och (f) Ga_2O_3 i enheter av eV/atom. Tips: kom ihåg att även för föreningar bör jämförelsen göras med avseende på de fria atomerna i gasfasen.
7. Var kan man hitta ett tvådimensionellt kvasi-kristallmönster i centrala Helsingfors? Tag gärna en bild på mönstret.